

## 結晶構造データベース仕様一覧

### ICSD (Inorganic Crystal Structure Database)

製作	FIZ Karlsruhe (独)
収録対象	1913年以降に発表された C-C 結合と C-H 結合を含まず、原子座標が完全に決定されたか、対応する構造タイプから決定された化合物 (金属、金属間化合物、合金、理論計算によって得られた構造も含む)。また、無機材料と類似の性質を持つ一部の有機金属化合物も収録
収録情報	化合物情報 (化学式、鉱物名)、結晶データ (空間群、格子定数、原子座標、ワイクフ位置、密度)、書誌情報、抄録、DOI など
収録件数	29.9 万件 (2024 年 4 月)
更新	年 2 回、年約 1.7 万件追加
使用可能機種	Windows 64bit PC (ICSD Desktop) または web 環境 (ICSD Web)
利用形態	年間定額ライセンス契約、大学等の割引あり、ICSD API の追加オプションあり
ダウンロード数	年間上限あり
トライアル	可能 (ICSD Web)

### ICSD API (追加オプション)

製作	FIZ Karlsruhe (独)
取得可能データ	ICSD の全ての収録値、CIF ファイル、結合長や角度、結晶構造図、粉末 X 線回折パターンなど
使用可能機種	web 環境 (Rest API)
利用形態	年間定額ライセンス契約、大学割引あり、ICSD 本体の追加オプションとして契約可能
ダウンロード数	上限なし
トライアル	可能

## 相図データベース仕様一覧

### ACerS-NIST Phase Equilibria Diagrams (PHASE)

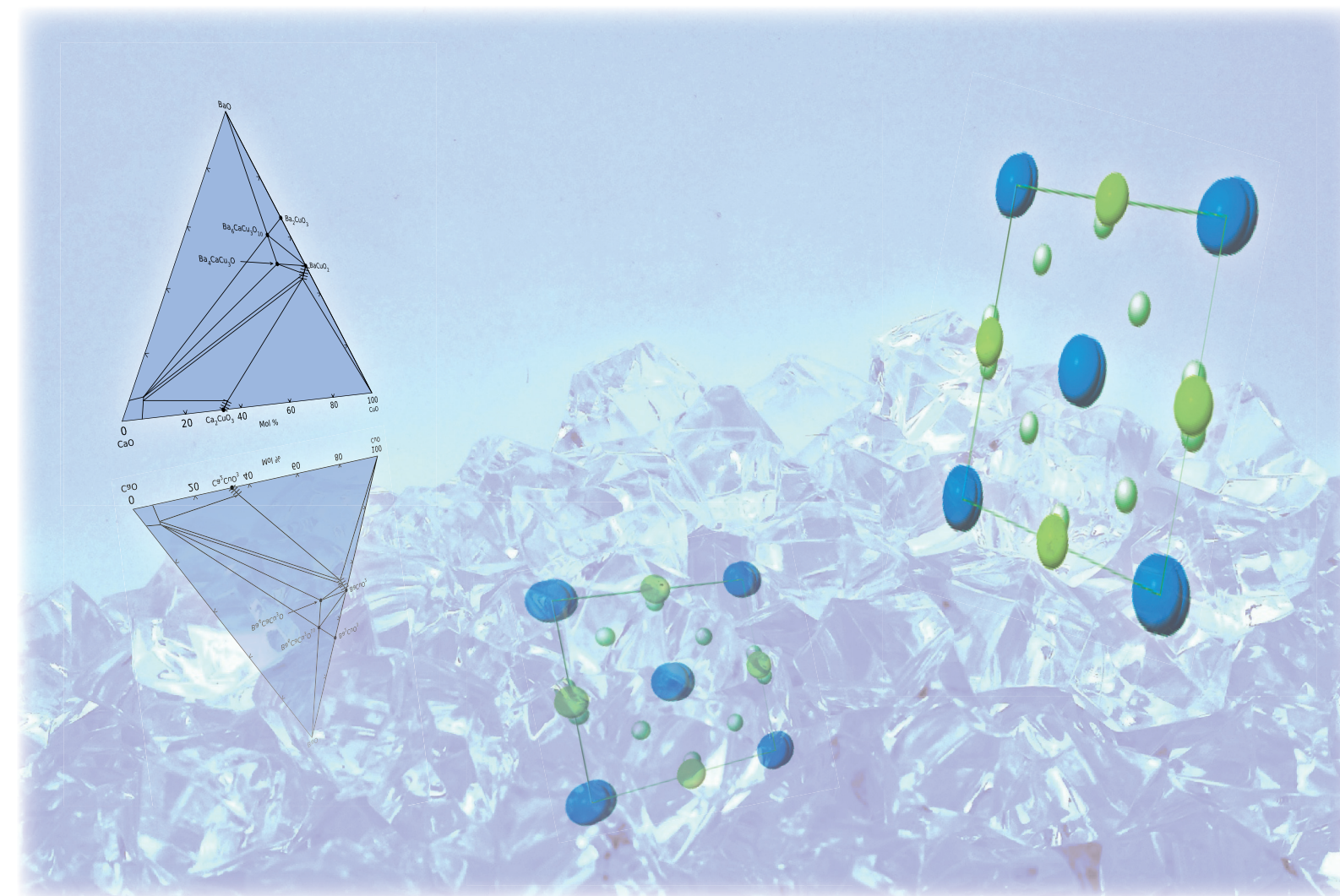
製作	The American Ceramic Society (ACerS. 米)、NIST (米)
収録対象	セラミックス、ガラス、塩、鉱物を含む無機材料
収録情報	名称、相図 (状態図)、各相の化学式、書誌情報など
収録件数	3.3 万件 (ver. 5.2、2024 年 4 月)
更新	年 1 回、年約 1 千件追加
使用可能機種	Windows PC (USB 版) または web 環境 (web 版)
利用形態	買取 (USB 版、アップグレード割引あり) または年間定額ライセンス契約 (web 版)
デモ版	あり

### ASM Alloy Phase Diagram Database™

製作	ASM International (米)
収録対象	二元系および三元系合金
収録情報	相図 (状態図)、各相の化合物情報 (化学式、結晶データ)、反応データ、書誌情報など
収録件数	4.0 万件 (2023 年 12 月)
使用可能機種	web 環境
利用形態	年間定額ライセンス契約、大学割引あり
トライアル	可能

無機化合物・セラミックス・金属・合金・金属間化合物

# 結晶構造データベース 相図データベース



**JAICI**  
化学情報協会



# 機能性材料の研究開発や製造管理に 便利な各種データベース

## 結晶構造データベース

### 無機結晶構造データベース ICSD Inorganic Crystal Structure Database

X線・中性子回折、理論計算によって完全に構造決定された鉱物・セラミックス・金属間化合物など、元素と無機化合物の結晶構造データを収録しています。また、理論計算によって得られた構造や、無機材料と類似の性質を持つ有機金属化合物の一部も収録され、多様な研究のニーズに応えられるよう、収録の幅が広がっています。世界中の多くの無機材料研究者に利用されている定番のデータベースです。

#### 構成:

- ◆ 検索ソフト: 化合物情報や結晶学データ、実験情報、書誌情報などから検索可能。
- ◆ 3D表示ソフト: JSmolが搭載。構造の観察に便利。
- ◆ 原子間距離・角度計算ソフト: 瞬時に計算結果を表示可能。
- ◆ 粉末パターン表示ソフト: X線および中性子線の粉末回折パターンのシミュレーションが可能。

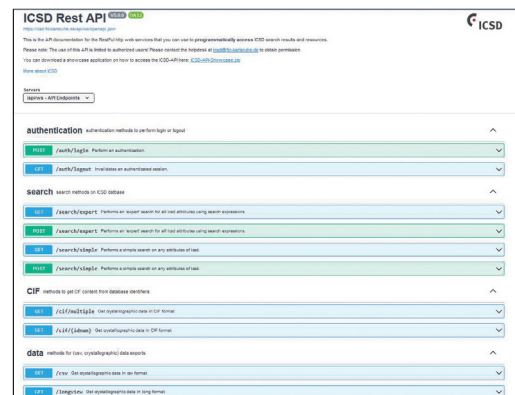
#### 特徴:

- ◆ 含有元素や組成式からの検索だけでなく、構造タイプや対称性などを含む充実した検索項目。
- ◆ すべてのレコードに原子座標を収録。
- ◆ レコードにDOIの記載があり、データの元文献へのアクセスが容易(文献へのアクセスは別途料金が必要)。
- ◆ 研究者1名からキャンパス・事業所単位までの契約形態あり。

#### 利用形態:

- ◆ ICSD Desktop: Windows PCにローカルインストールして利用(年2回、約10GBのインストール実行ファイルのダウンロードが必要)。
- ◆ ICSD Web: ID/passwordまたはIP address認証でログインして利用(要インターネット接続)。

### ICSD API (追加オプション)



APIのdocumentation/help画面

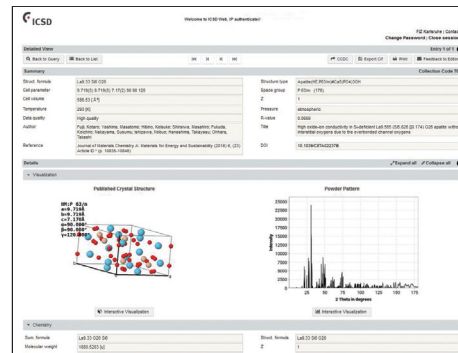
ICSDの追加オプションのAPI (Application Programming Interface) をご契約いただくと、自作のスクリプトにより、製作元の検索・表示用インターフェイスを経由せず、ICSDのデータを迅速に大量ダウンロード可能です。ICSD Desktop/ICSD Webの契約では年間ダウンロード数に上限がありますが、ICSD APIを追加契約すると、上限なくダウンロード可能となります。マテリアルズ・インフォマティクスや第一原理計算の大規模計算などにご活用ください。

#### ダウンロード形式:

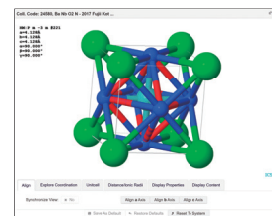
- ◆ 結晶学データ (CIF, CSV)
- ◆ 原子間距離・角度 (CSV)
- ◆ 結晶構造 (JPEG)
- ◆ 粉末回折パターンの画像 (JPEG)
- ◆ 粉末回折パターンの x-y データ (CSV) など



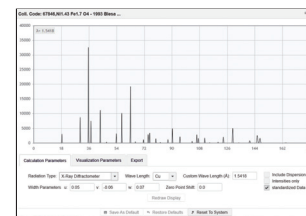
検索画面



レコード閲覧画面



結晶構造の3D表示画面



粉末回折パターン計算表示

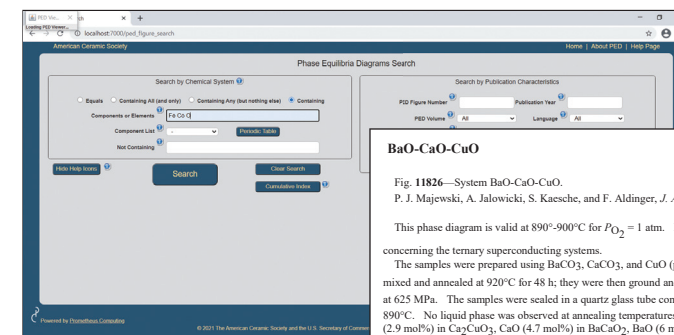
## 相図データベース

### セラミックス相図データベース PHASE ACerS-NIST Phase Equilibria Diagrams

セラミックスやガラス、塩、鉱物など、無機材料の相図(状態図)を収録した世界最大級のデータベースです。各相図に対して、セラミックスの専門家による解説があり、応用例に関する情報も得ることができます。相図のデータの品質を落とすことなく、組成軸の単位(モル%または質量%)の選択が可能な相図表示ソフトが付属しています。含有元素や成分、書誌情報などから検索できます。2024年4月にver. 5.2がリリースされました。USB版では、旧バージョンからのアップグレードが可能です。

#### 特徴:

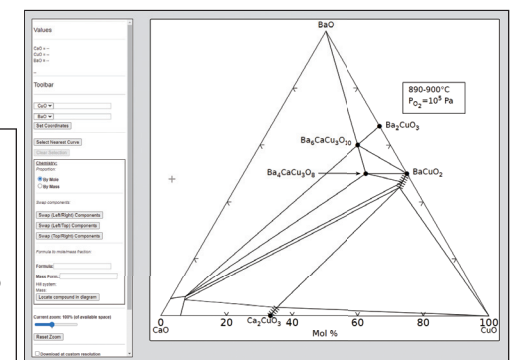
- ◆ 相図とその解説文を高画質で印刷可能なPDFで出力可能。
- ◆ 画面上の相図から組成、温度等を直接調べることができる表示ソフトが付属。
- ◆ いつも最新の情報を手に入れられる年間契約(web版)の他に、USB版の買取も可能。



検索画面

**BaO-CaO-CuO**  
Fig. 11826—System BaO-CaO-CuO.  
P. J. Majewski, A. Jalowicki, S. Kaesche, and F. Aldinger, *J. Am. Ceram. Soc.*, **84** [1] 183-187 (2001).  
This phase diagram is valid at 890°-900°C for  $P_{O_2} = 1$  atm. It is reliable and useful for studies concerning the ternary superconducting systems. The samples were prepared using BaCO<sub>3</sub>, CaCO<sub>3</sub>, and CuO (purity >99%). The precursors were first mixed and annealed at 920°C for 48 h; they were then ground and compacted by cold isostatic pressing (CIP) at 625 MPa. The samples were sealed in a quartz glass tube containing an oxygen atmosphere (1 bar) at 890°C. No liquid phase was observed at annealing temperatures of 890°-900°C. The solubilities of BaO (2.9 mol%) in Ca<sub>2</sub>CuO<sub>2</sub>, CaO (4.7 mol%) in BaCaO<sub>2</sub>, BaO (6 mol%) in CaO, Cu (6 mol%) in CaO were also determined. The solubility of CuO in BaO and CaO was less than 1 mol%.

解説文画面



相図表示ソフト

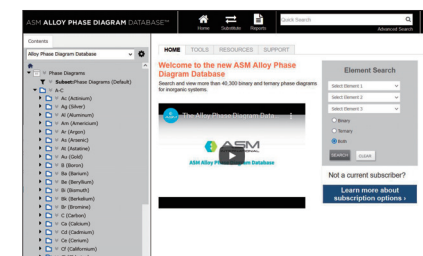
## 合金相図データベース

### ASM Alloy Phase Diagram Database™

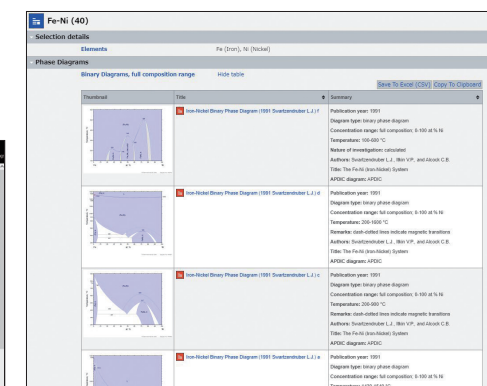
二元系および三元系合金の相図(状態図)を収録したデータベースです。各相図について、各相の結晶学データや反応に関するデータも収録しています(原子座標は含まず)。含有元素をドロップ・ダウンリストから選択することで簡単に検索できます。検索結果はCSVファイルで出力可能です。合金の製造管理から新素材の開発まで幅広くご利用いただけます。

#### 特徴:

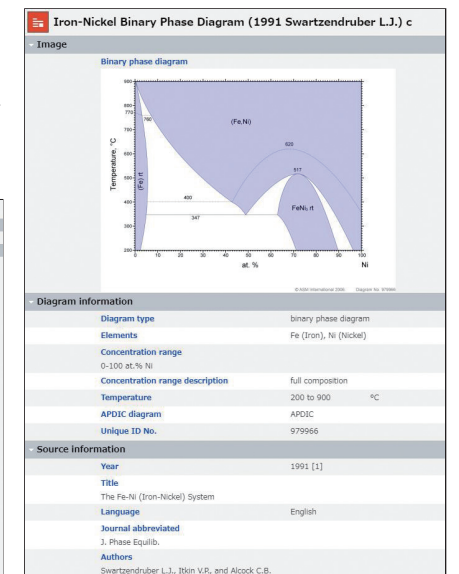
- ◆ 相図は画像ファイルで保存可能。
- ◆ 各相の化学式、ピアソンシンボル、空間群、格子定数等の結晶構造データをCSVファイルで保存可能。



検索画面



検索結果画面



レコード閲覧画面